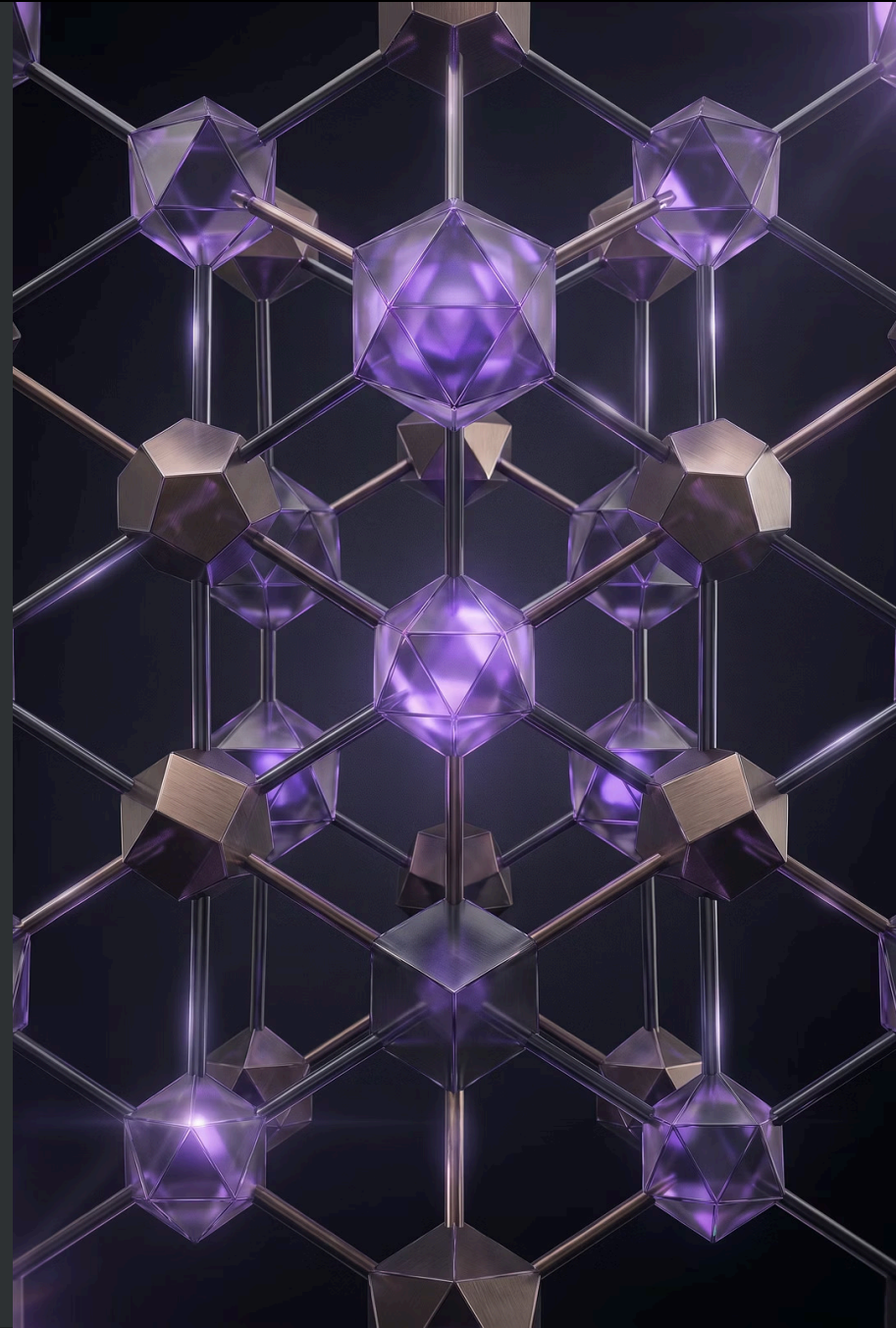
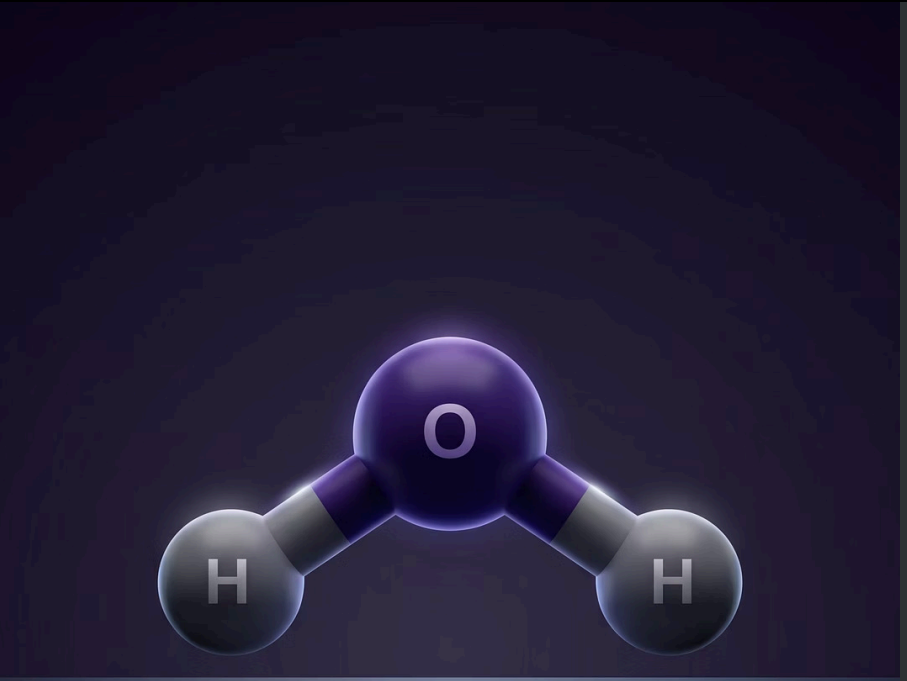
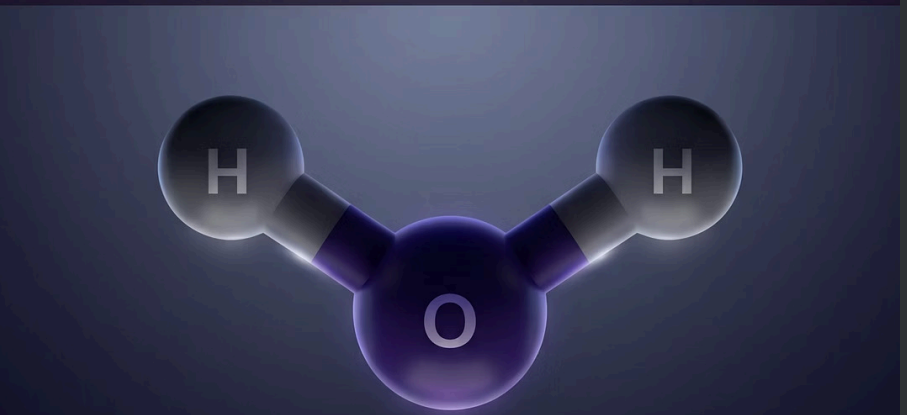
Moleküllerde Simetri ve Nizam

Nokta Gruplarından Biyolojik Homokiraliteye

DERS SUNUMU TERADİGMA







Simetri Nedir?

Bir molekül, belirli dönüşümler uygulandıktan sonra başlangıçtaki görünümünden ayırt edilemiyorsa, o moleküle **simetrik** denir.

Simetri Operasyonu

Molekülü değişmez bırakan dönüşümlere verilen addır.

Simetri Elemanı

Operasyonun gerçekleştiği geometrik referans noktası, ekseni veya düzlemidir.

Önemi

Simetri, molekülün fiziksel, kimyasal ve biyolojik özelliklerini doğrudan belirler.

> Felsefi not: Cansız ve şuursuz atomların, Grup Teorisi gibi insan aklının dahi kavramakta zorlandığı soyut bir matematiksel dile "kendiliklerinden" uyum sağlamaları imkânsızdır. Bu uyum, bir tasarımın geometrik mührüdür.

Simetri Elemanı 1 — Özdeşlik (E)

Her molekül, üzerine hiçbir işlem uygulanmadığında ya da 360° döndürüldüğünde değişmez kalır.

Etimoloji

E sembolü Almanca *Einheit* (Birlik) kelimesinden gelir.

Matematiksel Zorunluluk

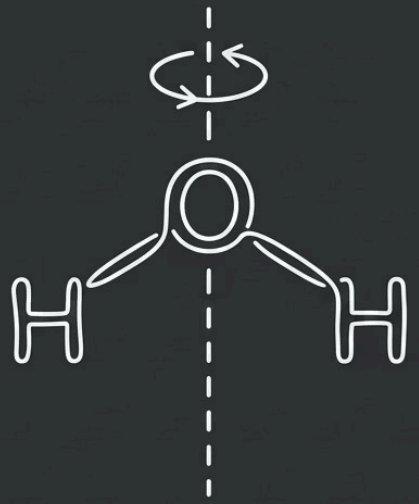
Grup teorisinin matematiksel tutarlılığı için vazgeçilmezdir.

Evrensel Kapsam

Her molekül, hangi karmaşıklıkta olursa olsun, bu "kendisi olma" durumundan yoksun bırakılmamıştır.

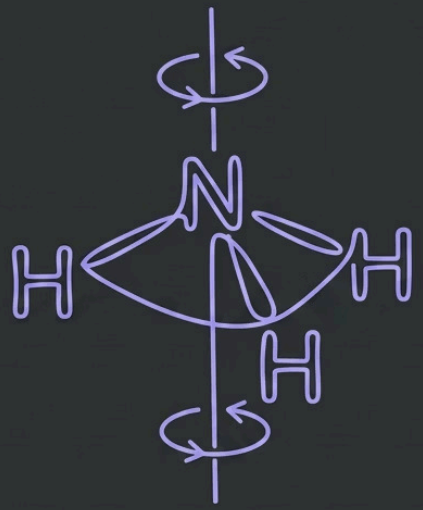
Simetri Elemanı 2 — Dönme Ekseni (Cn)

Bir eksen etrafında 360°/n açısıyla döndürüldüğünde molekül başlangıçtaki haliyle özdeş kalır.



H2O Molekülünün C2 Ekseni

180° rotasyon, iki katlı simetri



NH3 Molekülünün C3 Ekseni

120° rotasyon, üç katlı simetri

> Suyun C2 simetrisi, ona sıfır olmayan bir dipol moment kazandırır; bu da onu yaşam için eşsiz bir çözücü kılar. Daha yüksek simetride olsaydı bu özellik yok olurdu.

H_2O → C2 Ekseni
180° dönüşle özdeş kalır. İki katlı simetri.

NH_3 → C3 Ekseni
120° dönüşle özdeş kalır. Üç katlı simetri.

Simetri Elemanları 3 ve 4 — Ayna Düzlemi (σ) ve İnversiyon (i)

Ayna Düzlemi (σ)

Molekülü iki eşit parçaya böler; moleküle kararlılık kazandırır.

σh

Benzen halkasının yatay düzlemi

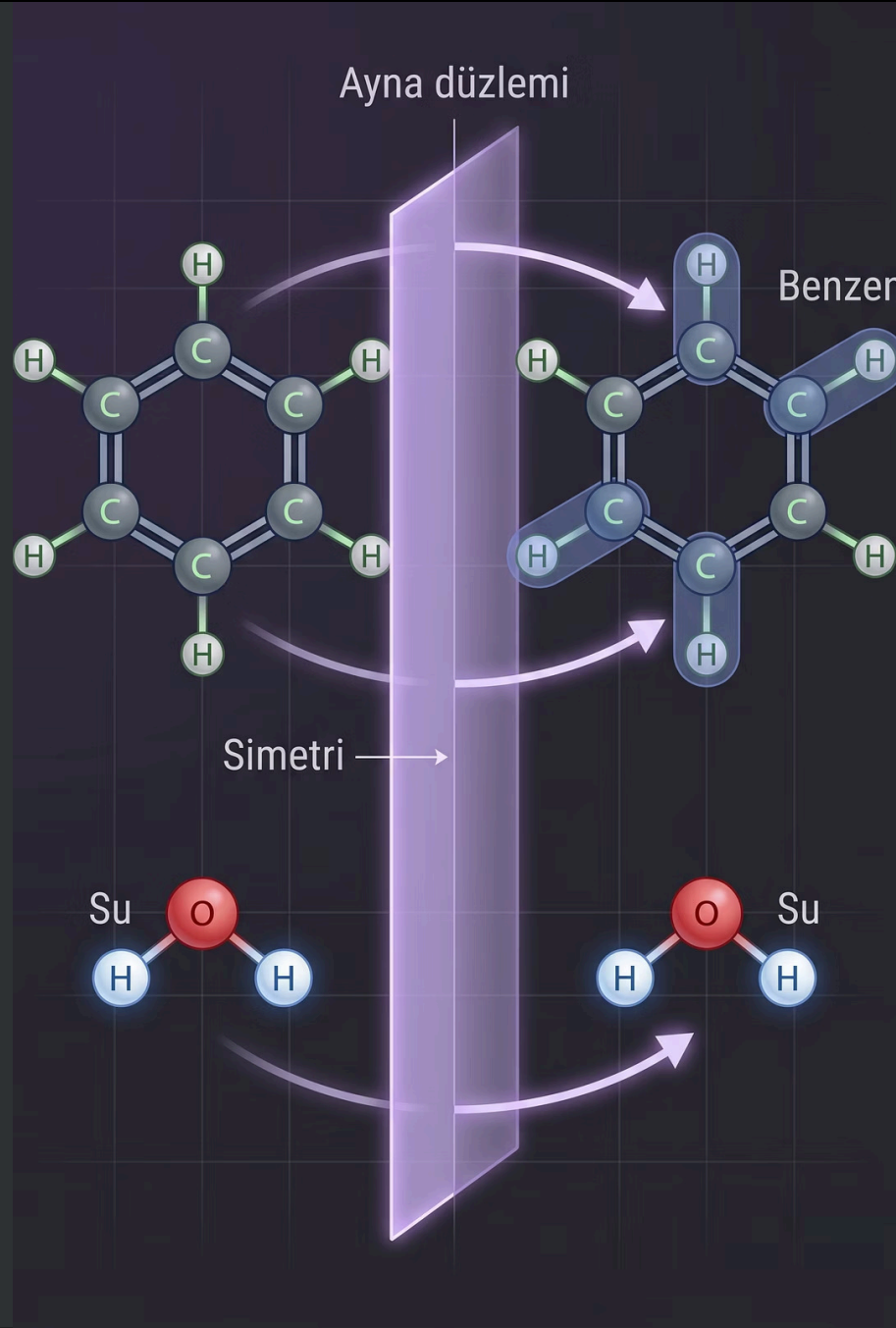
σv

Su molekülünü bölen dikey düzlemler

İnversiyon Merkezi (i)

Her atomun, kütle merkezinden geçilerek tam karşı yönde bir eşi bulunur.

SF6 bu simetriye sahiptir; dipol momenti sıfırdır. Tüm atomlar merkeze göre simetrik konumdadır.



Simetri Elemanı 5 — Dönme–Yansıma (Sn)

Bir eksen etrafında dönme ile ardından o eksene dik bir düzlemden yansımanın art arda uygulanmasıyla elde edilen bileşik operasyondur.

Sembol	Simetri Elemanı	Tanım
E	Özdeşlik	360° dönme veya işlem yok
Cn	Dönme Ekseni	360°/n açısıyla dönme
σ	Ayna Düzlemi	Düzlemden yansıma
i	İnversiyon	Merkeze göre ters alma
Sn	Dönme-Yansıma	Dönme + dik düzlemden yansıma

Nokta Grupları: Maddenin Sınıflandırılması

Moleküller, taşıdıkları simetri elemanlarının kombinasyonuna göre **nokta gruplarına** ayrılır.

Simetri Elemanlarını Belirle

Moleküldeki tüm E, Cn, σ, i ve Sn elemanları tespit edilir.

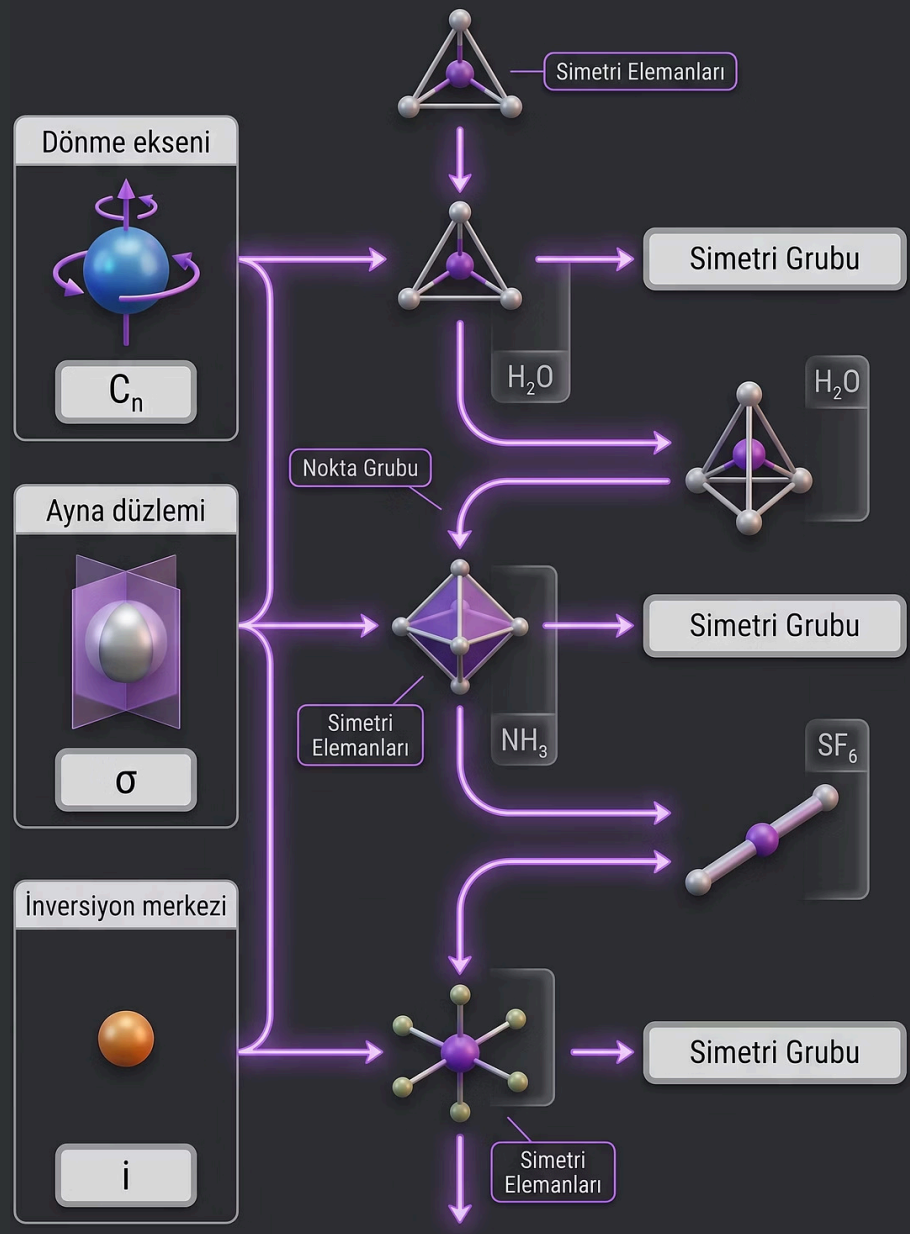
Akış Şemasını İzle

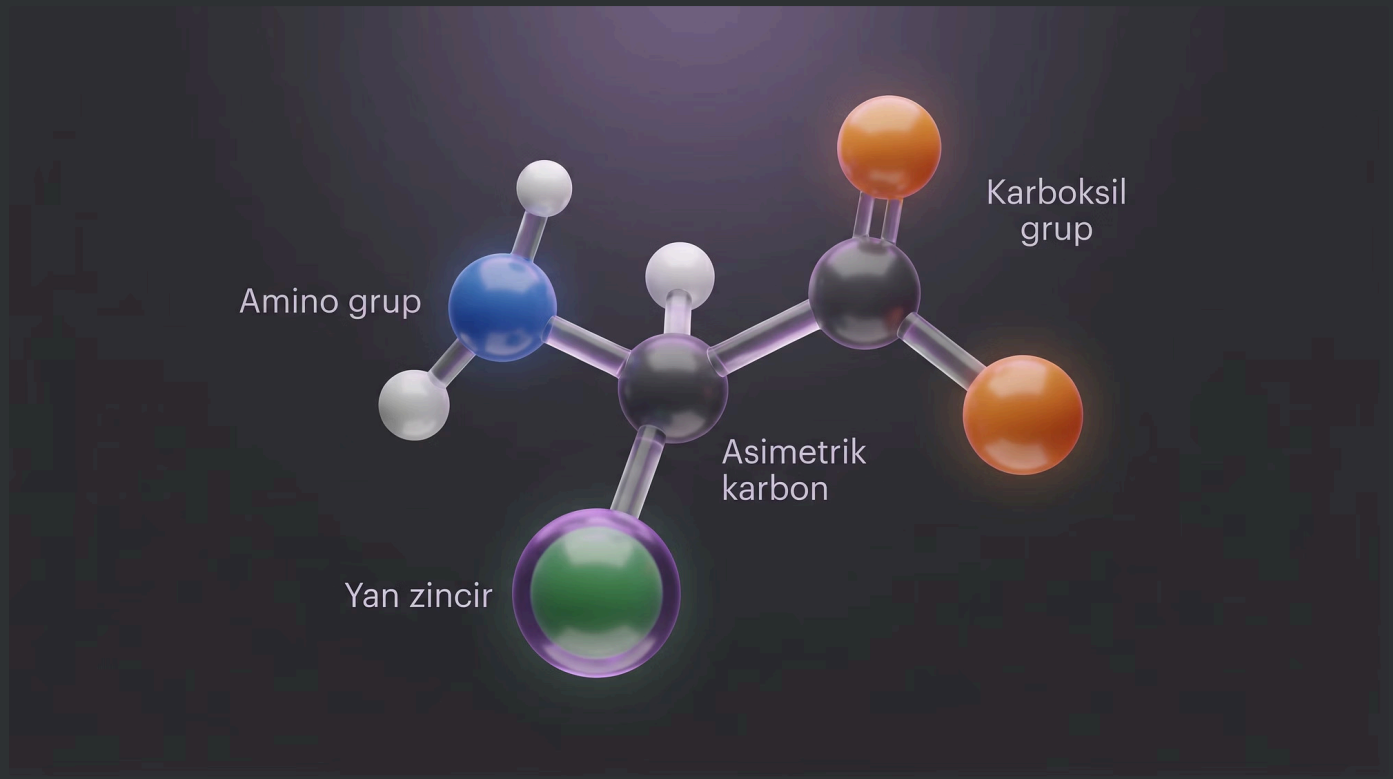
Schoenflies notasyonuna dayalı algoritma adım adım uygulanır.

Nokta Grubunu Ata

Her moleküle benzersiz bir grup etiketi atanır: C1, C2v, D6h, Td, Ih...

> Bu sistem, maddeye nakşedilen hiyerarşik düzenin bir keşfidir; icat değil.





Düşük Simetri: C1 Grubu

Yalnızca özdeşlik (E) elemanını barındıran en basit gruptur.

> İlaçların reseptörlere bağlanması ve enzimlerin çalışması ancak bu kiral asimetri sayesinde mümkündür.

Kiral Moleküller

Dört farklı gruba bağlı karbon atomu içeren kiral moleküller bu gruptadır.

Amino Asitler

Amino asitler C1 grubuna örnek gösterilebilir.

Biyolojik Önemi

Bu "asimetri" bir eksiklik değil; biyolojik tanıma ve seçicilik için zorunlu bir **anahtar yapıdır**.

Yüksek Simetri 1 — Benzen (D6h)

Benzen halkası, moleküler simetrinin mükemmellik örneklerinden biridir.

Simetri Elemanları

Ana eksen C6, buna dik 6 adet C2 ekseni ve birden fazla ayna düzlemi içerir.

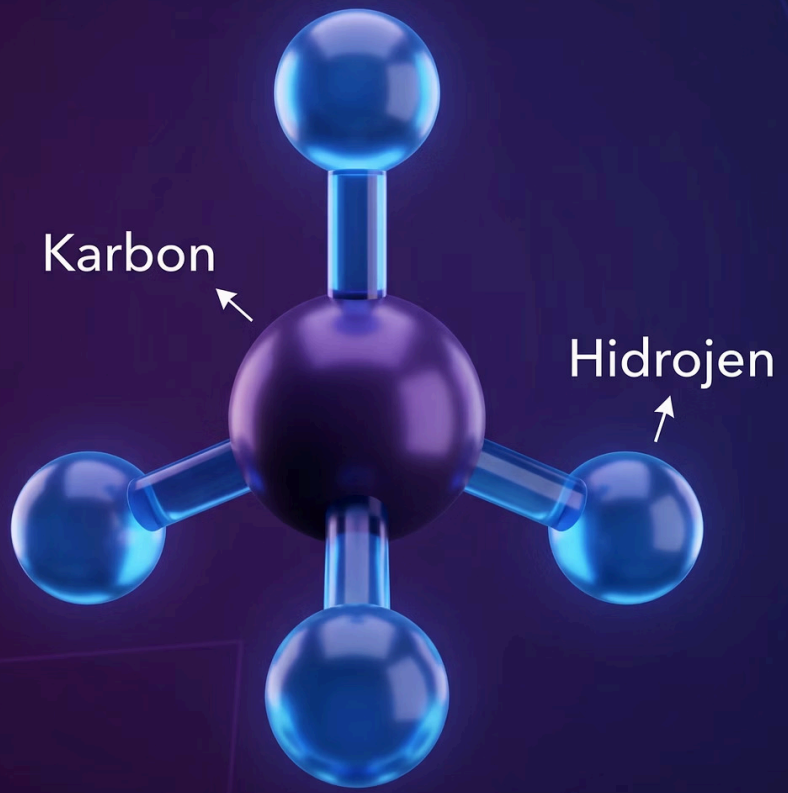
Aromatiklik

Bu yüksek simetri, benzene **aromatiklik** adı verilen ekstra kimyasal kararlılık kazandırır.

DNA ile Bağlantı

DNA yapı taşlarında bu kararlılık kullanılmış; genetik bilginin bozulmadan saklanması sağlanmıştır.

METAN MOLEKÜLÜ



Yüksek Simetri 2 — Metan (Td)

Metan molekülünde karbon atomunun dört bağı, uzayda birbirinden en uzak noktalara yönlendirilmiştir.

109.5°

Bağ Açısı

Kusursuz tetrahedral geometrinin açısı

4

Eşdeğer Bağ

Uzayda maksimum uzaklıkta konumlanmış

Bu geometri kusursuz bir **statik denge** örneğidir. Karbonun bu uzamsal geometrisi, devasa biyolojik moleküllerin inşasına zemin hazırlar.

Yüksek Simetri 3 — Virüs Kapsidi (Ih)

Birçok virüs kapsidi, doğadaki en yüksek simetri olan **ikozahedral** (yirmiyüzlü) yapıya sahiptir.

2025 Araştırmaları

Bu yapının **genom güdümlü** oluştuğunu göstermektedir.

Matematiksel Zorunluluk

Sınırlı genetik bilgiyle maksimum hacmi kapatmanın tek matematiksel yolu bu geometridir.

Tasarım İşareti

Şuursuz bir virüsün bu geometriyi "bilmesi" imkânsızdır; bu yapı, bir tasarım planına işaret eder.

Spektroskopi ve Seçim Kuralları

Simetri, moleküllerin ışıkla nasıl etkileşime gireceğini belirleyen kuralları koşullandırır.

> Peki katı "yasaklar" nasıl esnetilebilir? Bunu bir sonraki slayta taşıyalım.

İzinli Geçişler

Kuantum mekaniğinde bazı enerji geçişleri simetri analizine göre **izinli**dir.

Yasaklı Geçişler

Bazı geçişler ise **yasaklı**dır — bu kurallar Laporte kuralı olarak bilinir.

Türetim

Bu kurallar simetri analizinden doğrudan türetilir.

Vibronik Eşleşme: Kurala Esneklik

Molekül titreşirken simetrisi anlık olarak bozulur; bu bozulma bazı "yasaklı" geçişlere izin verir.

1

Simetri Kuralı

Genel çerçeve çizilir; bazı geçişler yasaklanır.

2

Titreşim

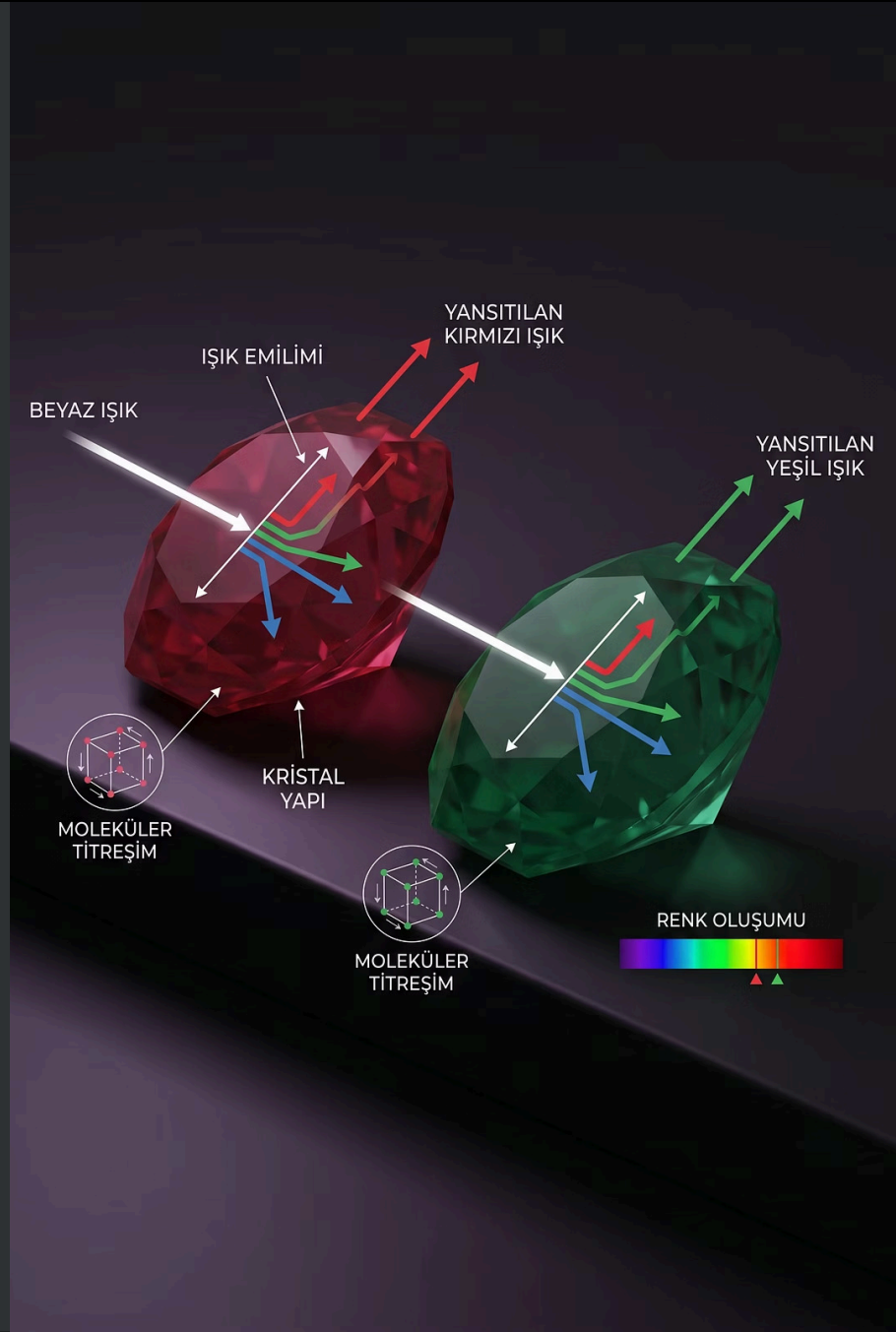
Molekül titreşirken anlık simetri bozulması yaşanır.

3

Vibronik Eşleşme

Yasaklı geçişlere kısmi izin verilir; renk ve sanat ortaya çıkar.

Değerli taşların ve metal komplekslerinin canlı renkleri bu yolla açıklanır. Simetri kırılmaları sanatın ve rengin ortaya çıkmasına vesile olur.



Biyolojik Homokiralite: Hayatın El Tercihi

Doğadaki amino asitlerin tamamı **L-formunda** (sol elli), DNA şekerleri ise **D-formunda** (sağ elli)dır.

Laboratuvar Sentezi

%50 L — %50 D karışık çıkar. Rasemik karışım kaçınılmazdır.

Canlılıkta

%100 saflık. Yalnızca L-amino asit, yalnızca D-şeker kullanılır.

$$2^{-300}$$

Olasılık

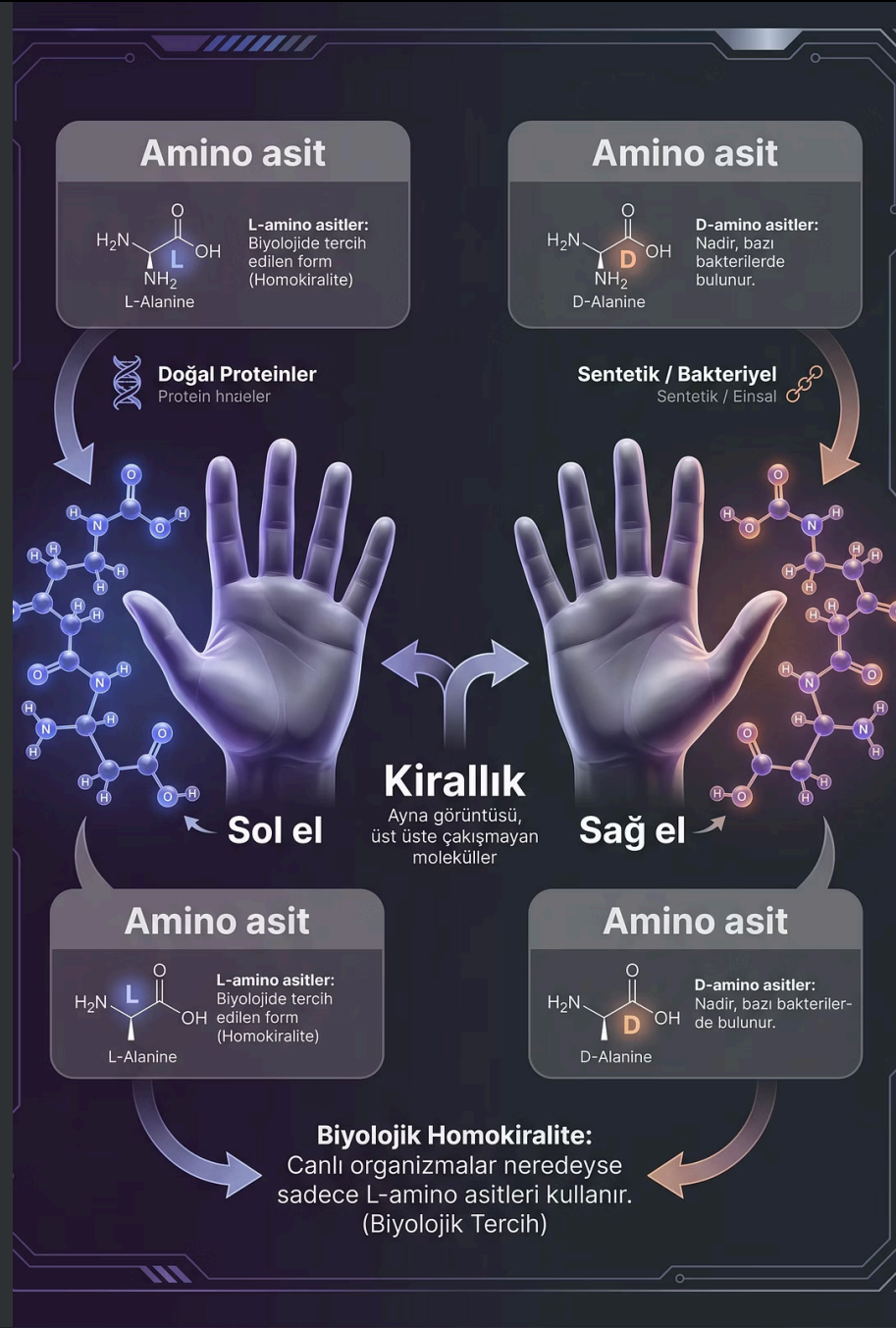
Ortalama bir proteinin rastgele L-formunda oluşma ihtimali

%100

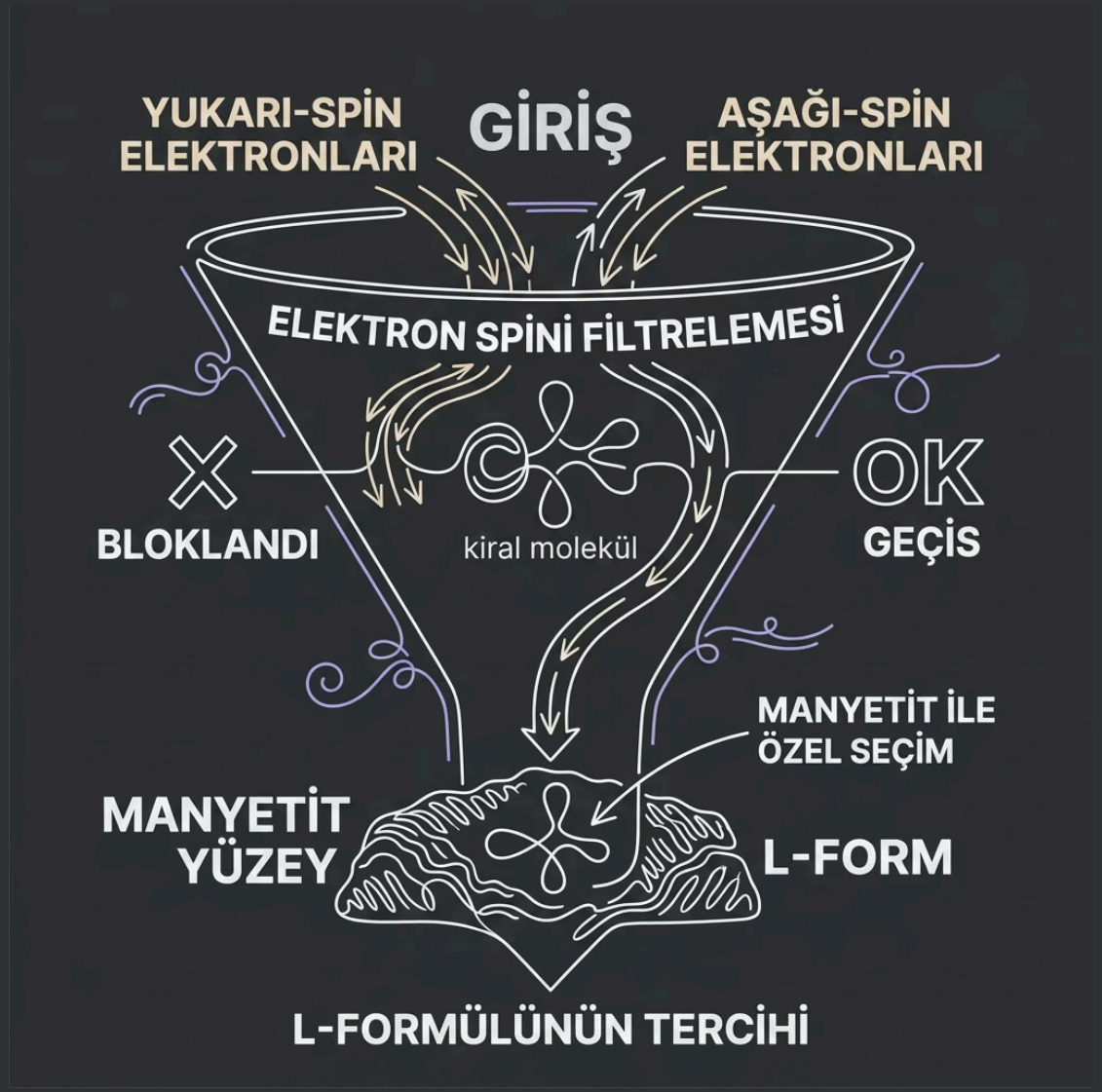
L-Form Saflığı

Tüm canlı sistemlerdeki amino asit saflığı

> Bu homokiralite tesadüflerle açıklanamaz; kaosun içinden yapılmış bir **seçimi** temsil eder.



CISS Etkisi: Homokiralitenin Mekanizması



2024–2025 araştırmaları, homokiralite arkasında **Kiralite Kaynaklı Spin Seçiciliği (CISS)** etkisini işaret etmektedir.

Spin Filtresi

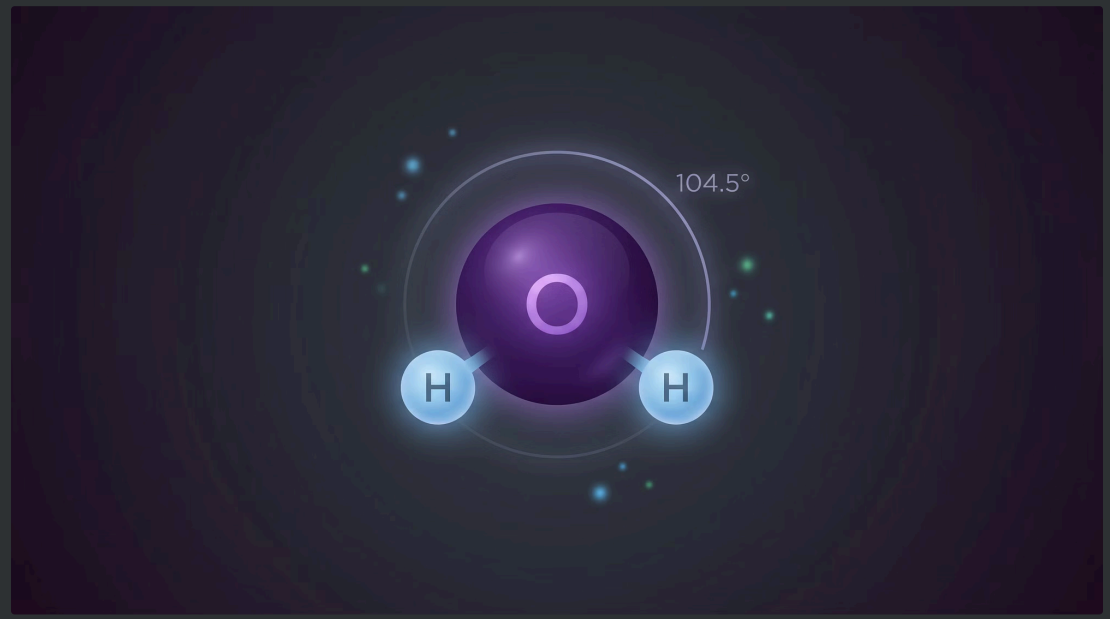
Kiral moleküller, elektronların **spin** (dönüş) yönünü filtreler.

Manyetit Yüzeyi

İlkel dünyadaki manyetik yüzeylerin bu özellik sayesinde yalnızca belirli formdaki molekülleri seçip kristalize ettiği öne sürülmektedir.

Yanıtsız Soru

Mekanizma açıklansa da bu seçimin **neden** tek bir form üzerinde sabitlendiği sorusu yanıtsız kalmaktadır.



İnce Ayar 1 — Suyun Bağ Açısı

Su molekülü (H2O) C2v simetrisine ve 104.5° bağ açısına sahiptir.

H_2S — 92°

Aynı grupta yer alır ama oda sıcaklığında gaz hâlindedir. Yaşamı destekleyemez.

CO_2 — 180°

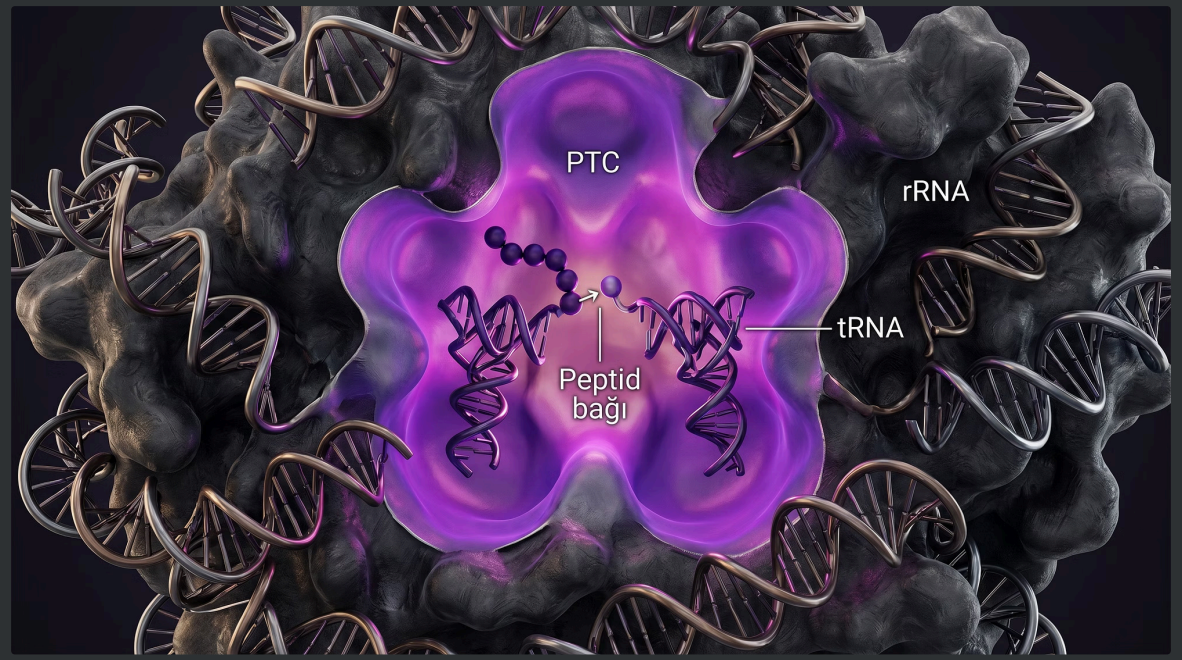
Doğrusal yapısıyla dipol taşımaz. Çözücü özelliği yoktur.

H_2O — 104.5°

İki uç arasına yerleştirilen hassas açı. Sıvı kalma, buzun yüzmesi, çözücülük.

İnce Ayar 2 — Ribozomun Simetrik Cebi

Protein sentezinin gerçekleştiği ribozomun merkezinde (**PTC** bölgesi) C2 simetrisine sahip özel bir cep bulunur.



2024 Araştırmaları

Bu cebin, RNA parçalarının **simetrik füzyonuyla** oluştuğunu öne sürmektedir.

İşlevi

Bu simetrik yapı, amino asitlerin hatasız birleşmesini mümkün kılar.

Tasarım Metaforu

Kör moleküllerin rastgele birleşmesiyle değil, belirli bir işlevi (protein sentezi) yerine getirmek üzere tasarlanmış bir "tezgâh" gibi işlev görür.

Sentez: Simetri Bir Kaza Değil

Bu derste ele aldığımız her bulgu, birbirini destekleyen bir bütünün parçalarıdır.

Grup Teorisi Uyumu

Atomların grup teorisi denklemlerine uyması

Suyun İnce Ayarı

Suyun açısının yaşamı destekleyecek biçimde ayarlanması

Virüs Geometrisi

Virüs kapsidinin en ekonomik geometriyi taşıması

%100 L-Formu

Biyolojik moleküllerdeki tam L-formu tercihi

> Bilim "nasıl" sorusuna cevap vererek mekanizmaları (CISS, vibronik eşleşme, seçim kuralları) ortaya koyar. "Niçin" ve "kim tarafından" sorusu ise bu nizamın arkasında bir ilim, irade ve kudret sahibinin bulunduğuna işaret eder.